安定化理論における台収束の応用について (Computer Algebra : Design of Algorithms, Implementations and Applications)

AUTHOR(S):

白柳, 潔; 関川, 浩

CITATION:

白柳, 潔 ...[et al]. 安定化理論における台収束の応用について (Computer Algebra : Design of Algorithms, Implementations and Applications). 数理解析研究所講究録 2007, 1568: 20-26

ISSUE DATE:

2007-09

URL:

http://hdl.handle.net/2433/81233

数理解析研究所講究録
第1568巻 2007年 20-26

安定化理論における台収束の応用について

白柳 潔*
東海大学理学部
KIYOSHI SHIRAYANAGI
SCHOOL OF SCIENCE, TOKAI UNIVERSITY
関川 浩†
日本電信電話株式会社 NTT コミュニケーション科学基礎研究所
HIROSHI SEKIGAWA
NTT COMMUNICATION SCIENCE LABORATORIES, NIPPON TELEGRAPH AND TELEPHONE CORPORATION

1 はじめに

近年、数値数式融合計算の研究が活況を呈してきている。近似代数 [12] や SNAP (Symbolic-Numeric Algebra for Polynomials)[26] の研究は、その代表格であろう。その中で、白柳と M. Sweedler が提案したアルゴリズムの安定化理論 [24] も、年々、さまざまな計算に応用されつつある。近似代数や SNAP が、「ノイズのある入力から、意味のある出力を探し求める」という立場であるのに対し、安定化理論では、「正確な入力から、近似計算によって、正確な出力に接近するか到達する」という立場をとっている。

安定化理論の手法で安定化されたアルゴリズムで、入力の精度桁を上げていけばその出力が真の出力に収束するようになる。これは、「係数収束」と呼ばれるものであるが、実は安定化されたアルゴリズムの実行後にある細工をすると、それより強い「台収束」が実現できる。本論文では、この台収束を利用して、浮動小数点計算により、ある項順序の厳密係数グレブナ基底から別の項順序の厳密係数グレブナ基底に変換する新しい手法について提案する。

2 安定化理論

2.1 理論の復習

次のアルゴリズムを対象に安定化理論の復習を簡単に行う。詳細は [20] を参照されたい。

- データは、すべて多項式環 $R[x_1,\ldots,x_m]$ の元からなる。R は実数体の部分体である。
- データ間の演算は、$R[x_1,\ldots,x_m]$ 内の加減乗または剰余計算である。
- データ上の述語は、不連続点をもつとすればそれは 0 のみである。

*shirayan@ss.u-tokai.ac.jp
†sekigawa@theory.brl.ntt.co.jp

述語の不連続点が 0 という意味は、If "$C = 0$" then ... else ... のように、値が 0 か否かによって分岐が別れることである。上記クラスのアルゴリズムを、不連続点 0 の代数的アルゴリズムとよぶ。ほとんどの数式処理のアルゴリズムはこのクラスに入るか、このクラスのアルゴリズムに変換可能である。

さて、安定化の 3 つのポイントは、

- アルゴリズムの構造は変えない。
- データ領域において、ふつうの係数を区間係数に変える。
- 述語の評価の直前で、区間係数のゼロ書換えを行なう。

である。すなわち、安定化されたアルゴリズムは次のようになる。

区間領域 データ領域は区間係数多項式の集合。区間係数は $[A,\alpha]$ なる形で、$A \in R$, α は非負の実数。$[A,\alpha]$ は集合 $\{x \in R \mid |x - A| \leq \alpha\}$ を意味する。

区間演算 二項演算 $* \in \{+,-,\times,/\}$ に対し、$[A,\alpha]*[B,\beta] = [A*B,\gamma_*]$. ここに、$\gamma_*$ は、$|x-A| \leq \alpha, |y-B| \leq \beta \Rightarrow |x*y - A*B| \leq \gamma_*$ を満たす。

ゼロ書換え 不連続点 0 をもつ述語を評価する直前で、各区間係数 $[C,\gamma]$ に対し、

$|C| \leq \gamma$ ならば $[C,\gamma]$ を [0,0] に書き換えよ。

$|C| > \gamma$ ならばそのままとせよ。

区間演算の具体的な定義については、文献 [1] を参照されたい。

今、入力 $f \in R[x_1,\dots,x_m]$ を $f = \sum_{i_1,\dots,i_m} a_{i_1 \dots i_m} x_1^{i_1} \cdots x_m^{i_m}$ と表したとき、f に対する近似列 $\{Int(f)_j\}_j$ を $Int(f)_j = \sum_{i_1,\dots,i_m} [(a_{i_1 \dots i_m})_j, (\alpha_{i_1 \dots i_m})_j] x_1^{i_1} \cdots x_m^{i_m}$ で定義する。ここに、すべての $i_1,\dots,i_m$ について、任意の j に対し、$|a_{i_1 \dots i_m} - (a_{i_1 \dots i_m})_j| \leq (\alpha_{i_1 \dots i_m})_j$ であり、$j \to \infty$ のとき、$(\alpha_{i_1 \dots i_m})_j \to 0$ である。このとき、単に $Int(f)_j \to f$ と書く。

さて、$\mathcal{A}$ を安定化したアルゴリズムを $Stab(\mathcal{A})$ と書くと、次が安定化理論の基本定理である。

定理 1 (係数収束) $\mathcal{A}$ は不連続点 0 の代数的アルゴリズムで、入力 $f \in R[x_1,\dots,x_m]$ に対し正常終了するとせよ。このとき、f に対する任意の近似列 $\{Int(f)_j\}_j$ に対し、ある n が存在して、$j \geq n$ ならば、$Stab(\mathcal{A})$ は $Int(f)_j$ に対し正常終了し、

$$Stab(\mathcal{A})(Int(f)_j) \to \mathcal{A}(f).$$

簡明を期すため、入力は一つだけの多項式にしているが、入力はもちろん、多項式の有限集合でもよい。多くの場合、係数収束より強い「台収束」が重要となる。まず「台」を定義する。

$f = \sum_{i_1,\dots,i_m} a_{i_1 \dots i_m} x_1^{i_1} \cdots x_m^{i_m}$ の台とは、集合 $\{x_1^{i_1} \cdots x_m^{i_m} \mid a_{i_1 \dots i_m} \neq 0\}$ で、これを $Supp(f)$ と記す。

$f_j \to f$ が台収束するとは、係数収束し、かつ、ある有限の n があって、$j \geq n$ ならば $Supp(f_j) = Supp(f)$ となることである。

ここで、次の方法によって台収束が実現できる。

$Stab(\mathcal{A})$ の実行後に、各区間係数にゼロ書換えを施す。

このアルゴリズムを $Stab(\mathcal{A})_R$ と書く。このとき、次の定理が成立する。

定理 2 (台収束) $\mathcal{A}$ は不連続点 0 の代数的アルゴリズムで、入力 $f \in R[x_1,\dots,x_m]$ に対し正常終了するとせよ。このとき、f に対する任意の近似列 $\{Int(f)_j\}_j$ に対し、ある n が存在して、$j \geq n$ ならば、$Stab(\mathcal{A})_R$ は $Int(f)_j$ に対して正常終了し、$Stab(\mathcal{A})_R(Int(f)_j)$ は $\mathcal{A}(f)$ に台収束する。

ここでも簡明を期すため、入力は一つだけの多項式にしているが、多項式の有限集合でもよい。

この台収束は著しい性質であって、文献 [28] においても crucial notion として紹介されている。本論文の主題は、この台収束を使って厳密係数のグレブナ基底を求めることである1)。

2.2 これまでの応用例

安定化理論がこれまでに応用された例を表に示す。区間表示および区間演算はすべて浮動小数点近似による。各々の詳細については、表中の参考文献を参照されたい。

アルゴリズム	出力	実験者と実験年
Buchberger	グレブナ基底	(白柳 93) [18], (尾崎 94) [15], (日吉 97) [5], (Traverso-Zanoni 02) [27], (Krandick 05) [8]
Sturm	実根の個数	(関川 95) [23]
Graham など	2 次元および 3 次元 凸包	(関川 95&98) [16]
単因子法	スミス標準形	(新妻 96) [22]
Greville	一般逆行列	(水口 96-98) [9], (村上 01) [11]
Gauss	三角行列	(村上 01) [10]
Wu	Characteristic Set	(野竹 00) [14], (白石 01) [17]
Lazard-Rioboo-Trager	有理関数不定積分	(Khungurn 05) [6]

ここに、(Traverso-Zanoni 02) は、安定化手法だけを直接使ったものではないが、そのアイデアを取り込んで計算しているため、表に載せた。

これらの実験の結果から得られた共通の知見として、「正確演算で計算したときに係数膨張が計算の遅い主要な要因と思われるとき、安定化手法は有効である」という経験則がある。

2.3 精度問題

本論文の主題には直接関係ないが、安定化理論の重要な未解決問題である精度問題について、最近進展があったので簡単に触れておく。

安定化定理により、十分大きな精度になれば、収束性が保証されているが、具体的にどの程度の精度で十分であるかを予め、見積もることを精度問題と呼ぶ。実は精度問題は一般に、アルゴリズムだけではなく、入力にも依存する極めて難しい問題である。文献 [21] では、簡単な例によって、これがいかに難しい問題であるかを示した。

ところが、最近、Pramook Khungurn が精度桁について画期的な研究 [7] を行った。彼は、安定化されたアルゴリズムを浮動小数点計算で実行したときの実行過程が、元のアルゴリズムを正確演算で実行したときの実行過程と一致する最小の入力精度を Minimum Converging Precision (MCP) と呼んだ。まず、先に

1)以前、台収束を利用した「計算履歴法」[19, 25] を提案し、厳密係数グレブナ基底を計算した。これも有効な場合がある。

精度問題の困難さを述べたが、彼は、ある種の GCD 計算のアルゴリズムの場合、MCP を一般に計算する関数は存在しないことを証明した。更に、ユークリッドの互除法について、特定な係数領域 ($\mathbb{Z}$, $\mathbb{Q}$, $\mathbb{Z}[\xi]$ (ξ はある代数的整数) など) の場合に、その MCP の下界を与えた。シルベスター行列を QR 分解して GCD を求めるアルゴリズムに対しては、MCP については未解決であるものの、正しい次数を得る最小精度や正しい台を得る最小精度についてはその下界を与えた。彼の仕事は、安定化理論の未解決問題の一つであった精度問題に対し、GCD 計算の場合にはじめて解答を与え、本理論をより実用に近づけた点で高く評価される。今後の更なる発展に期待したい。

3 安定化手法に基づくグレブナ基底変換

次の問題を考える。

問題： あるゼロ次元の実係数多項式イデアルに対し、ある項順序のグレブナ基底が与えられているとき、他の項順序のグレブナ基底を求めよ。

典型的には、一般に計算が速いとされる項順序 graded reverse lexicographic order または graded lexicograpic order のグレブナ基底を求めておき、それを使って、計算が遅いとされる項順序 lexicographic order のグレブナ基底を求めるという設定が多い。

整数係数や有理数係数の場合、この問題に対しては、既に FGLM アルゴリズム [4] や野呂-横山 [13] による研究がある[2)]。すなわち、適当な単項式とそれに対する未定係数を用意し、予め与えられているグレブナ基底で簡約したものを 0 とおいた、未定係数に関する線型方程式を解くというものである。特に整数係数の場合は、ある適当な素数 p を選んで mod p でブッフバーガアルゴリズムを実行し、その結果からグレブナ基底の台を予想して、未定係数法を使うとより効率的である。本論文で提案する手法は、mod p の代わりに精度 μ の浮動小数点近似を使うものである。

方法： $Stab(Buchberger)_R$ を用いて、ある精度で浮動小数点グレブナ基底の台を求める。その上で未定係数法を行う。失敗したら、精度を上げてやり直す。ここに、*Buchberger* はブッフバーガアルゴリズムである。

これをアルゴリズムの形にまとめておく。F を $R[x_1, \ldots, x_m]$ の有限部分集合とし、イデアル $I = \langle F \rangle$ は 0 次元であると仮定する。

Stab_ConvGroebner（安定化手法に基づくグレブナ基底変換アルゴリズム）
Input: I の項順序 $<_0$ に関するグレブナ基底 G_0, 項順序 $<$
Output: I の $<$ に関するグレブナ基底

$\mu := M$ （浮動小数点精度の初期値）
again
loop
  $G_\mu \leftarrow \langle G_0 \rangle$ の $<$ に関する精度 μ の浮動小数点グレブナ基底 (by $Stab(Buchberger)_R$)
  $G \leftarrow \emptyset$
  for all $g \in G_\mu$ do
    if $NF_{G_0,<_0}(\sum_{t\in Supp(g)} a_t t) = 0$ を満たす $\{\tilde{a}_t\}_{t\in Supp(g)}$ ($\tilde{a}_t \in R$) が存在する
    then $G \leftarrow G \cup \{\sum_{t\in Supp(g)} \tilde{a}_t t\}$
    else μ を上げる　goto again
    endif
  endfor

[2)]その他の方法に、Gröbner walk[3] がある。これは Gröbner fan の中の道を辿って変換を実現するもので、任意次元のイデアルに対して可能であるが、一般に計算は遅い。

if G が $< G_0 >$ の $<$ に関するグレブナ基底である

then return G else μ を上げる　goto again

endloop

ここに、最後の if 文の、G が $< G_0 >$ の $<$ に関するグレブナ基底であるかどうかのチェックは、

1. G の各ペアの S 多項式が $G,<$ によって 0 に簡約されることによって、G が $<$ に関するグレブナ基底であることを確認、

2. G_0 の各元が $G,<$ によって 0 に簡約されることによって、$< G > \supseteq < G_0 >$ であることを確認

の 2 本立てで行う。上記アルゴリズムにより、G の各元が $G_0,<_0$ によって 0 に簡約されているので、$< G > \subseteq < G_0 >$ は既に成立している。従って、2. により、$< G >=< G_0 >$ がいえるのである。すなわち、安定化手法に基づくグレブナ基底変換アルゴリズム **Stab_ConvGroebner** の正しさは保証される。停止性も、必ず有限の精度で正しい台を得るという定理 2 により直ちに導かれる。

4 計算機実験

Stab_ConvGroebner を実装し、実際に計算機で実験したのでその一部を報告する。使用システムは Maple 10、計算機環境は Dell Dimension DC051 (Intel(R) Pentium 4 CPU: 3.00GHz, RAM: 2.99GHz, 0.99GB) である。ここでは、例題を 5 つ挙げる。いずれも、与えられた多項式集合 F に対し、イデアル $< F >$ の tdeg のグレブナ基底を予め与えておいて、それから $< F >$ の plex のグレブナ基底を求めるという問題である。ここに、tdeg は graded reverse lexicographic order, plex は lexicographic order である。ここでは、グレブナ基底といえば、簡約化されたグレブナ基底 (reduced Gröbner basis) を指す。

1. $F = \{f_1, f_2, f_3\}$, ここに $f_1 = \frac{1}{7}x^2 - \frac{3265483908854652}{272974017239}x + \frac{12637812236281}{712638126}y^2 + \frac{26872672361827}{7263188218281}z^2$, $f_2 = \frac{3}{8}xy + \frac{12367812638123}{763812368213132}yz - \frac{63812638126}{77263812831}y$, $f_3 = \frac{4}{9}x + \frac{327091270979304}{24122375460421}y + \frac{18467031595309203}{318405459032}z - \frac{356318063693141319}{6436561806418109}$.

2. $F = \{(\sqrt{2} + \sqrt{5})x^3y + \sqrt{3}xy + \sqrt{7}, (\sqrt{3} - \sqrt{2})x^2y^2 - \sqrt{7}xy + \frac{\sqrt{11}}{11}\}$.

3. $F = \{ex + \sqrt{2}y + \sqrt{3}z, exy + \sqrt{5}yz + \sqrt{3}zx, xyz - e\}$, ここに e は Napier's number (2.71828...).

4. $F = \{\sqrt{2}ex^2 + xy^2 - z + 1/4, \sqrt{3}x + y^2z + 1/2, \sqrt{5}ex^2z - 1/2x - y^2\}$.

5. $F = \{\sqrt{2}e/\pi x^3y + (\sqrt{3} + \pi)xy + \sqrt{7}/(e - \pi), (1 - e\sqrt{3})/e \cdot \pi x^2y^2 - (\sqrt{7} - e)xy + e/\sqrt{11}\}$, ここに π は円周率.

例 1,5 はそれぞれ文献 [18] にある example 5,7 であり、例 2 は同文献の example 6 の係数を多少複雑にしたものである。例 3 はグレブナ基底計算ベンチマークの一つ cyclic3 の係数を変えたもの、例 4 はブッフバーガーの教科書 [2](p.214) にある例に係数変形を施したものである。

結果について表にまとめる。

例	GB(tdeg) by Maple	基底変換	MP	GB(plex) by Maple
1	0.03	0.28	4	0.09
2	1.03	0.88	3	5.25
3	1.26	0.84	3	116.61
4	0.25	50.14	10	>3,600
5	>3,600	-	-	>3,600

表の説明をする。GB(tdeg) by Maple は、Maple 10 の Groebner パッケージの組み込み関数 Basis によって tdeg で計算した所要時間（秒)、基底変換は **Stab_ConvGroebner** の所要時間（秒）である。ここに、**Stab_ConvGroebner** の実行には、浮動小数点精度の初期値を 1 に設定し、失敗するごとに 1 ずつ上げて行った。MP はそれが成功した最小の精度である。そして、参考までに GB(plex) by Maple は、Basis によって plex で計算した所要時間（秒）である。>3,600 は、3,600 秒（一時間）待っても出力されなかったことを、- は、実行できなかったことを示す。

考察：実験結果から、今回提案の安定化手法に基づくグレブナ基底変換アルゴリズムは、有理数係数の場合よりも無理数係数の場合の方がより有効であることがわかった。特に代数的数だけでなく、超越数も含まれるとその効果は絶大である。基底変換の所要時間の中には、G が $< G_0 >$ の $<$ に関するグレブナ基底であることをチェックする時間も含まれているが、その割合はどの場合も比較的小さかった。それはチェックされる多項式集合が、グレブナ基底である可能性が高い "素性の良い" 集合だからと考えられる。

有理数係数や整数係数の場合は、FGLM アルゴリズムや mod p による未定係数法が有力であるが、無理数、特に超越数が含まれる場合は、浮動小数点計算の威力を発揮できる本提案手法が大変有効になり得る。

しかし、例 5 のように、tdeg でさえ計算ができない場合は本手法を使うことができない。この場合は tdeg の代わりに他の項順序を探るか、Maple 以外の数式処理システムで（可能ならば）tdeg のグレブナ基底を求めておくことが考えられる。また、plex でも浮動小数点グレブナ基底は高速に求まったので、基底変換というアプローチはとらず、先に触れた計算履歴法を試みてもよいだろう。

5 おわりに

安定化手法に基づくグレブナ基底変換アルゴリズムを提案し、非常に有効な場合があることを実験により確認した。今後の課題として、正しい台が得られる精度を理論的に見積もること、無理数係数の工学的、社会的実例への応用、そして台収束の他の代数問題への応用などが挙げられる。

[1] Alefeld, G. and Herzberger, J.: *Introduction to Interval Computations, Computer Science and Applied Mathematics, Academic Press* (1983).

[2] Buchberger, B.: Gröbner Bases: An Algorithmic Method in Polynomial Ideal Theory, *Chapter 6 in Multidimensional Systems Theory (N. K. Bose ed.), D. Reidel Publishing Company* (1985), 184-232.

[3] Collart, S., Kalkbrenner, M. and Mall, D.: Converting bases with the Gröbner walk, *J. Symbolic Computation* **24** 3-4 (Sep. 1997), 465–469.

[4] Faugère, J., Gianni, P., Lazard, D., and Mora, T: Efficient Computation of Zero-Dimensional Gröbner Bases by Change of Ordering, *J. Symbolic Computation* **16** 4 (Oct. 1993), 329–344.

[5] 日吉: 計算代数・計算幾何における近似計算の利用法, 東京大学 (計数工学)1996 年度修士論文 (1997).

[6] Khungurn, P.: Stabilizing an Algorithm for Integrating Rational Functions, *preprint* (2005). (http://web.mit.edu/pramook/www/18.337/report.pdf)

[7] Khungurn, P.: Sharayanagi-Sweedler Algebraic Algorithm Stabilization and Polynomial GCD Algorithms, *Master Eng. Thesis at MIT* (2007).

[8] Krandick, W.: Symbolic Algebraic Techniques for Steady State Power System Analysis, *slides* (2005). (http://www.drexel.edu/coe/news/articles/rd05/393.pdf)

[9] Minakuchi, H., Kai, H., and Noda, M-T.: Algorithms of Generalized Inverse and their stabilization, *Electronic Proc. ATCM'98* (1998).
(http://www.atcm.mathandtech.org/EP/1998/ATCMP046/paper.pdf)

[10] 村上, 甲斐, 野田：区間演算によるハイブリッド有理関数近似と安定化理論について、京大数理研講究録, **1295** (2002), 197–202.

[11] 村上, 白柳： 安定化理論の文字認識への応用、数式処理, **8** 4 (2002), 11–13.

[12] 野田, 甲斐： 数式処理と数値計算 – いかに結合させるか？, 情報処理 **39** 2 (1998), 105–110.

[13] 野呂、横山: グレブナー基底の計算 基礎篇　計算代数入門, 東京大学出版会　(2003).

[14] 野竹, 甲斐, 支, 野田： Wu's method の浮動小数化, 京大数理研講究録 **1199** (2001), 1–9.

[15] 尾崎, 白柳: Maple の Interval Package を用いた浮動小数グレブナ基底の計算, 数理解析研究所講究録, **920** (1995), 38–52.

[16] 関川, 白柳: 凸包アルゴリズムの安定化, 日本数式処理学会第４回大会配布資料 (1995).

[17] 白石： 安定化した Wu's method のロボット制御への応用, 京大数理研講究録, **1295** (2002), 203–208.

[18] Shirayanagi, K.: Floating Point Gröbner Bases, *Mathematics and Computers in Simulation*, **42** 4-6 (1996), 509–528.

[19] 白柳: 安定化理論と出力の妥当性について, 数式処理, **5** 1 (1996), 46–47.

[20] 白柳: アルゴリズムの安定化理論, 数式処理, **5** 2 (1997), 2–21.

[21] 白柳: 安定化理論に関するいくつかの注意, 数理解析研究所講究録, **1295** (2002), 189–196.

[22] 白柳, 新妻: 実多項式行列スミス標準形の安定な浮動小数点計算法, 情報処理学会論文誌, **40** 3 (1999), 1006–1017.

[23] 白柳, 関川: ゼロ書換えに基づいた区間法と Sturm のアルゴリズムへの応用, 電子情報通信学会論文誌 A, **J80-A** 5 (1997), 791–802.

[24] Shirayanagi, K. and Sweedler, M.: A Theory of Stabilizing Algebraic Algorithms, *Technical Report 95-28, Mathematical Sciences Institute, Cornell University* (1995), 92 pages.

[25] Shirayanagi, K. and Sweedler, M.: Remarks on Automatic Algorithm Stabilization, *J. Symbolic Computation* **26** 6 (Dec. 1998), 761–766.

[26] Special Issue of Symbolic-Numeric Algebra for Polynomials, *J. Symbolic Computation* **26** 6 (Dec. 1998).

[27] Traverso, C. and Zanoni, A.: Numerical Stability and Stabilization of Groebner Basis Computation, *Proc. ISSAC 2002* (2002), 262-269.

[28] Windsteiger, W.: Floating Point Gröbner Bases – An Annotated Bibliography, *his homepage* (1995).
(http://www.risc.uni-linz.ac.at/people/wwindste/Research/GB/
Bibliography/bibliography/bibliography.html)